

Braunschweigische
Wissenschaftliche Gesellschaft

Jahrbuch 2018

Sonderdruck
Seiten 73–94



J. CRAMER Verlag • Braunschweig
2019

Vom Experiment zur Vorhersage des Bauteilverhaltens in der Festkörpermechanik*

STEFAN HARTMANN

Institut für Mechanik, TU Clausthal, Adolph-Roemer-Straße 2 a,
DE-38678 Clausthal-Zellerfeld, E-Mail: stefan.hartmann@tu-clausthal.de

Zusammenfassung

Moderne Computer-Programme zur Berechnung des Deformationsverhaltens von Bauteilen unter äußeren Belastungen bedingen physikalische Modelle. Diese sogenannten Materialmodelle liegen entweder für spezielle Materialien vor, oder sie müssen hierzu entwickelt werden. Die in den mathematischen Gleichungen auftretenden Parameter sind dann an spezielle Messungen anzupassen. Anschließend ist es möglich diese Materialmodelle in Berechnungsprogramme zu implementieren, um damit Vorhersagen komplexer Strukturen bzw. Bauteilen durchzuführen. Dieser Gesamtprozess erfordert Kenntnisse in der Durchführung von Experimenten, in der Konzeptbildung zur Entwicklung von Modellen, in der numerischen Umsetzung von meist gekoppelten partiellen Differentialgleichungen sowie in der Identifikation der in den Modellen auftretenden Materialparameter. Darüber hinaus sind Konzepte der Verifikation und Validierung der Berechnungen zu berücksichtigen und weiterzuentwickeln. Die gesamte Vorgehensweise liegt in vielen anderen Wissenschaftsgebieten vor. Hier konzentrieren wir uns auf Problemstellungen der Mechanik fester Körper.

1. Einleitung

Das Bedürfnis das Verhalten von Bauwerken, des Untergrundes (Böden), von Maschinen oder generell das Verhalten technischer, biologischer, pharmazeutischer Systeme und Strukturen vorherzusagen, haben Natur-, Lebens- und Ingenieurwissenschaftler gemeinsam. Hierbei werden mathematische Modelle herangezogen, die das Verhalten experimenteller Beobachtungen wiedergeben und zu Vorhersagen ihre Verwendung finden. Damit verbunden ist die Breite an Kenntnissen und Er-

* Der Vortrag wurde am 14.07.2018 vor der Plenarversammlung der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft gehalten.

Key words and phrases. Experimentelle Mechanik, Kontinuumsmechanik, Numerische Mechanik, Kontinuierliche Optimierung.

fahrungen im Bereich der Durchführung von Experimenten, der mathematischen Modellbildung, der numerischen Berechnung bzw. der Weiterentwicklung numerischer Berechnungsverfahren sowie die Kalibrierung der Modelle an Messdaten erforderlich. Darüber hinaus sollten auch Aussagen über die Genauigkeit getroffen werden, die nicht nur die Präzision der numerischen Berechnung der auftretenden Gleichungen impliziert (Verifikation), sondern auch die Prognosegüte (Validierung) betreffen. Die damit verbundene Schwierigkeit ist, dass jedes Themengebiet in sich besondere Herausforderungen, Kenntnisse bzw. Erfahrungen und individuelle Möglichkeiten in Form von Kooperationspartnern unterschiedlicher Disziplinen in deren Umfeld bedingen. In diesem Beitrag beschränken wir uns daher auf Fragestellungen der Festkörpermechanik, also der Beschreibung der Bewegung bzw. Deformation materieller, fester Körper aufgrund äußerer Einwirkung.¹ So erkennt man, dass die Werkstofftechnik und Materialwissenschaften sowie die Produktionstechnik über das Experiment mit der Mechanik gekoppelt ist. Zum Teil stellt man auch einen Einzug in die Modellierung fest, da sich in zunehmendem Maße Informationen auf atomarer und molekularer Ebene mit in die Modellbildung einbeziehen lassen. Andererseits findet die anwendungsnahe Mathematik und Technomathematik eine Spielwiese in der mathematischen Modellbildung sowie der Numerik (Simulation von Randwertproblemen sowie die Entwicklung nichtlinearer Optimierungsverfahren in der Parameteridentifikation). Daher nimmt die Festkörpermechanik, aufgrund ihrer Interdisziplinarität, als möglicher Kooperationspartner eine besondere Stellung, insbesondere in größeren Forschungsk Kooperationen, ein.

Abb. 1 verdeutlicht die vier Säulen der Festkörpermechanik, die durch komplexe Bauteilsimulationen mit vorgegebenen Computerprogrammen komplettiert wird. Alle Fragestellungen sollten daraufhin in das Forschungsfeld aus Verifikation und Validierung eingebettet sein, siehe zur Terminologie (Babuska & Oden 2004).

Im Folgenden werden die Themen *Experiment*, *Modellbildung*, *Numerik* und *Materialparameteridentifikation* sowie *Verifikation* und *Validierung* in der Mechanik detaillierter angesprochen.²

2. Experimente

Die experimentelle Festkörpermechanik wurde nach ihrem ursprünglichen Erblühen in der Nachkriegszeit durch das vermehrte Anwenden der Numerischen Mechanik in den 1980er Jahren an deutschen Universitäten immer mehr zurückgefahren. Dabei hat sie sich vorwiegend mit der Untersuchung des Materialverhaltens unter

¹ Der Übergang von festem zum flüssigen Zustand ist nahtlos. Die Unterscheidung in der mathematischen Modellbildung wird in (Truesdell and Noll, 1965, Sect. 32-33) und (Haupt, 2002, Sect. 7.3.2) diskutiert.

² Es wird nur ein Auszug existierender Literatur angegeben. Der Beitrag repräsentiert daher einen persönlichen Blickwinkel.

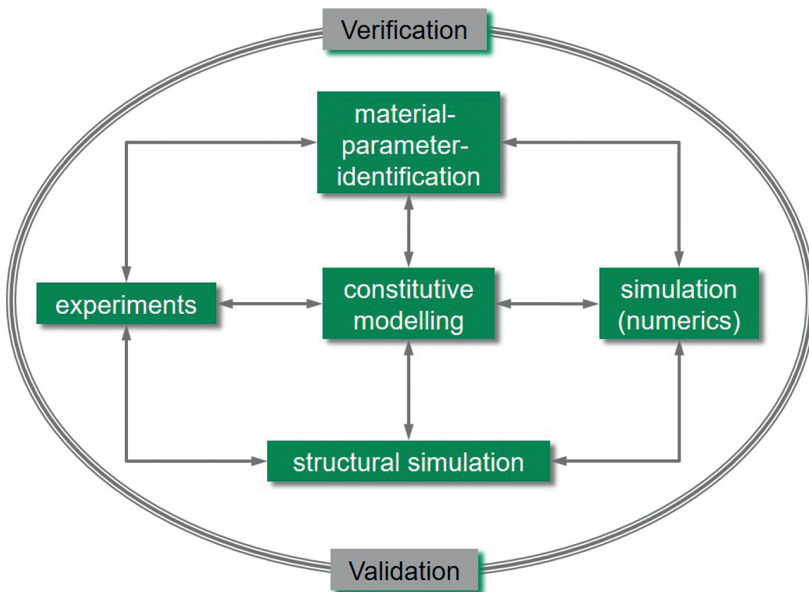


Abb. 1: Aufgaben der Festkörpermechanik.

Zug-, Druck-, Scher-, Biege-, Innendruck-, Biaxial-, und Torsionsbelastung beschäftigt. Angetrieben wurde dies zunächst vornehmlich durch den einsetzenden Kraftwerksbau mit den damit verbundenen sicherheitsrelevanten Aspekten und später durch die Umformtechnik, die sich maßgeblich mit Fragestellungen der Automobilindustrie befasste. Damit waren vorwiegend metallische Materialien von besonderem Interesse. In den letzten Jahren hat sich dies jedoch in Richtung vieler anderer Materialien (Polymere, Keramiken, Betone, Holz, . . .) geändert. Zudem sind die experimentelle Probe berührenden Messsysteme aufgrund zunehmenden Fortschritts in der Elektronik weiterentwickelt und immer höheren Genauigkeiten erreicht worden. Wegen der höheren Unterhaltungskosten der Labore mit ihrer experimentellen Ausstattung sowie des damit verbundenen personellen Aufwandes – im Vergleich zu rein theoretischen Arbeiten oder der Entwicklung von Computerprogrammen – ist dieser Zweig der Mechanik immer mehr reduziert und durch anwendungsnahe, werkstofftechnische Fachdisziplinen übernommen worden.

Die deutsche Forschungsgesellschaft der Mechanik hat sich seit den 1960er Jahren aufgrund der sich immer mehr etablierenden Berechnungsmethode, der *Methode der finiten Elemente*, welche heutzutage das Prognosewerkzeug der Wahl für das Verhalten komplexer Bauteilgeometrien in der Industrie darstellt, in Richtung der Numerischen Mechanik entwickelt. Seit wenigen Jahren jedoch werden an

einzelnen Hochschulen wieder Labore aufgebaut, da sich einerseits gezeigt hat, dass die experimentelle Durchführung mit unterschiedlichen Prozessführungen zur mathematische Modellbildung der auftretenden physikalischen Problemstellungen nur in eigenen Laboren durchführbar ist, und andererseits die Erkenntnis besteht, dass die Entwicklung vieler Materialmodelle und die Berechnung komplexer Bauteile und Strukturen, ohne eigene experimentelle Befunde bzw. deren experimentellen Unterfütterung, nur einen sehr beschränkten Erkenntnisgewinn haben (und zum Teil auch fragwürdig erscheinen). Zudem liegen heutzutage optische, d.h. berührungsfreie Messmethoden vor, die das Temperatur- und Deformationsverhalten auf einem Teilgebiet der Probenoberflächen während der Versuche aufnehmen können. Darüber hinaus können aufgrund erheblich verbesserter mikroskopischer Möglichkeiten (μ -CT Aufnahmen, FIB, SEM, . . .) auch die physikalischen Ursachen der Deformation besser interpretiert werden. Damit liegen ganz neue Möglichkeiten vor, Versuchsergebnisse des Bauteilverhaltens zu analysieren, womit sich die Mechanik gerade in den letzten Jahren zu einem sehr heterogenen Forschungsgebiet entwickelt hat. Dies ist einerseits durch die Modellbildung multiphysikalischer Ursachen (chemische, elektrische, magnetische und thermische Einwirkungen auf das Deformationsverhalten) und andererseits durch die Einbindung mikromechanischer Vorgänge zur Interpretation des makroskopischen Bauteilverhaltens verursacht. Dabei entsteht eine Mehrskaligkeit in Raum und Zeit, was sowohl die experimentelle Durchführung als auch die Modellierung vor große Herausforderungen stellt.

Neben der reinen Entwicklung der Messtechnik existieren drei große Zielsetzungen in der experimentellen Mechanik:

- (1) Zunächst liegt der Fokus auf der Durchführung von Experimenten zur Darlegung physikalischer Beobachtungen.
- (2) Nach der Entwicklung von Materialmodellen zur Beschreibung dieser Effekte müssen die in den Modellen auftretenden Materialparameter angepasst werden, was als *Materialparameteridentifikation* bzw. *Kalibrierung* bezeichnet wird.
- (3) Zur Validierung der Modelle müssen dann unabhängige Experimente mit anderen Prozessführungen oder anderen (komplexeren) Probengeometrien durchgeführt werden.

Für diese Zwecke ist man in der Festkörpermechanik an zeitlichen Belastungsprozessen interessiert, d.h. wie sich die Deformationen innerhalb eines materiellen Körpers unter einem äußeren Belastungsprozess einstellt, oder umgekehrt, wie die Spannungsantwort aufgrund eines vorgegebenen Deformationsprozesses aussieht. In der Werkstoff- oder Produktionstechnik ist dies meist nicht der Fall, da dort eher Kennzahlen zur Charakterisierung der Materialeigenschaften herangezogen werden.

2.1. Mechanische Prüfeinrichtung: In der Mechanik ist im Experiment, wie zuvor erläutert, ein verschiebungs- oder winkелgesteuerter bzw. ein kraft- oder momenten-

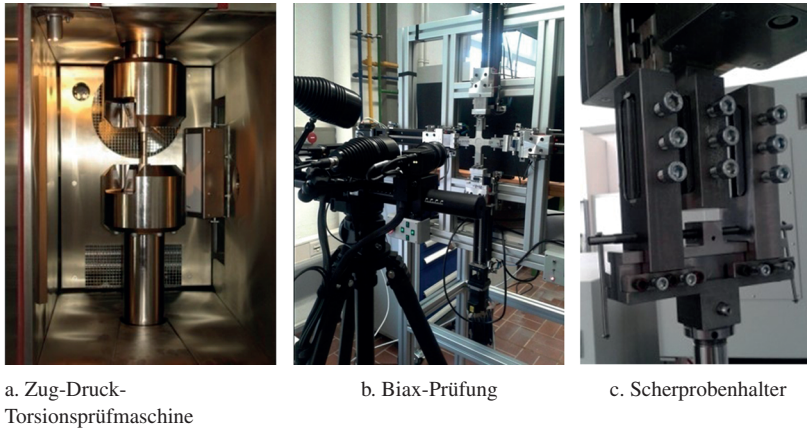


Abb. 2: Beispiele von Prüfmöglichkeiten.

gesteuerter Prozess der Zeit von Interesse. Liegt ein optischer Zugang zur Probe vor oder werden sogenannte Dehnungsmessstreifen bzw. Ansetzdehnungsaufnehmer auf der Probe appliziert, so können auch "lokale Größen" zur Messung oder auch zur Steuerung der Probenhalterbewegung einer Prüfmaschine genutzt werden. Daher muss in *Testeinrichtung* und *Messmöglichkeiten* unterschieden werden. Das Untersuchen von Materialien erfolgt durch einaxiale Zug-Druckprüfmaschinen, Biaxial- oder Triaxialprüfungen,³ Scher-, Torsions-, Biege- und Eindruckversuche oder viele andere, komplexere Untersuchungsmöglichkeiten. Abb. 2 stellt verschiedene klassische Prüfeinrichtungen dar, wohingehend Abb. 3 zugehörige Zug-, Biax und Torsionsproben wiedergibt.

2.2. Messtechnik der Deformation: Die zuvor genannten Versuche müssen mit der Messung physikalischer Größen vervollständigt werden, wobei hier Dehnungen auf der Oberfläche von Interesse sind – diese stellen eine über einen gewissen Bereich gemittelte Größe dar, die durch Dehnungsmessstreifen (DMS; Aufkleben kleiner elektrischer Bauteile, die bei einer Deformation eine Änderung des elektrischen Widerstands zeigen, siehe Abb. 4(a)), Ansetzdehnungsaufnehmer (Messung der Abstandsänderung zweier Berührungspunkte auf der Probenoberfläche, Abb. 4(b)), oder auch die Gesamtlängenänderung, gemessen mit der Bewegung der Probenhalterung in der Prüfmaschine, ermittelt werden. Heutzutage können auch optische Verfahren herangezogen werden, falls ein optischer Zugang zur Probe vorliegt.

³ Hierbei gibt es neben der Möglichkeit eines Rohres unter Innendruck und überlagerter Zug- und Torsionsbeanspruchung auch vollständige dreiaxiale Belastungseinrichtungen, siehe (Calloch and Marquis, 1999).

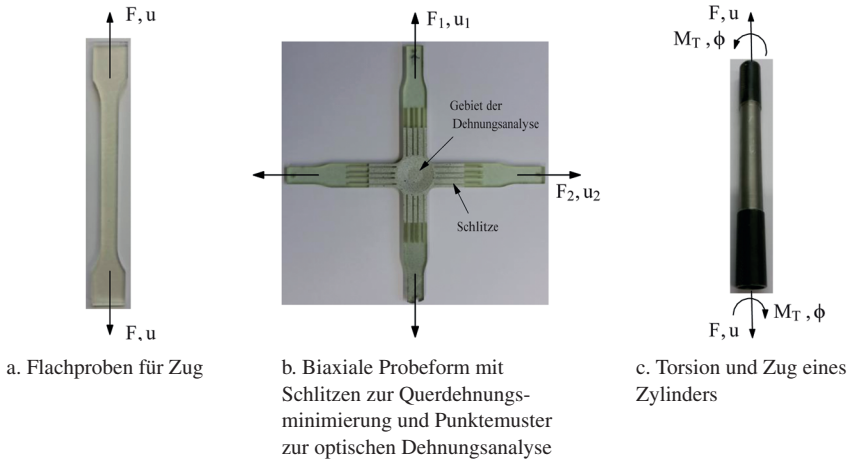
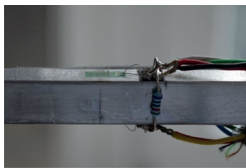


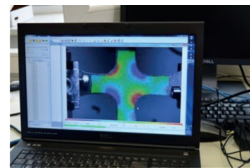
Abb. 3: Probenformen (entweder Vorgabe der Kraft $F(t)$ und Messung der Längenänderung $u(t)$ oder Steuerung von $u(t)$ und Messung von $F(t)$; analoges gilt für $F_1(t)/F_2(t)$ und $u_1(t)/u_2(t)$ sowie dem Torsionsmoment $M_T(t)$ und dem Verdrehwinkel $\phi(t)$).



(a) Dehnmessstreifen zur lokalen Messung von Dehnungen



(b) Ansetzdehnungsaufnehmer zur integralen Messung von Verzerrungen



(c) Bildkorrelationsverfahren, zur flächigen Messung von Oberflächenverzerrungen, siehe Abb. 2(b) für das Kamerasystem

Abb. 4: Beispiele von Prüfmöglichkeiten.

Hierbei werden entweder wenige oder sehr viele Marker (Punktemuster) auf die Probe aufgebracht, um aus der Bewegung der Punkte mit Bildkorrelationsverfahren die Oberflächenverzerrung zu bestimmen, siehe (Sutton et al. 2009). Damit liegt nicht nur eine Information, sondern die räumliche Verteilung der Verzerrungen und Verschiebungen in der Probenoberfläche vor, siehe Abb. 4(c). Zu weiteren optischen Verfahren siehe auch (Hild & Roux 2013). Liegt kein optischer Zugang vor, wie zum Beispiel bei Umformprozessen, so kann man sich lediglich die Abstandsänderungen der Punkte (meist durch Aufätzen der Marker auf die Oberfläche der Probe) vor und nach dem Versuch anschauen, d.h. in situ erhält man keine Dehnungsinformation,

so dass meist nur die integralen Werte wie Kraft und Verschiebung als Funktion der Zeit t der Prüfmaschine bekannt sind.

2.3. Prozessführung: Es gibt unendlich viele Prozessführungen im Experiment (zyklische Prozesse, Kriech- und Relaxationspfade, Geschwindigkeitsabhängigkeit, Bruchversuche, . . .). In (Haupt 1993) bzw. (Haupt 2002) ist daher eine Klassifikation experimenteller Beobachtungen bei isothermen Versuchen in vier Kategorien vorgeschlagen worden, um einerseits eine saubere sprachliche Trennung von Beobachtung (Geschwindigkeitsabhängigkeit bzw. -unabhängigkeit, Gleichgewichtskennlinie bzw. -hysterese), andererseits die auf diesen Beobachtungen aufbauenden Materialmodelle zu klassifizieren (Elastizität, Plastizität, Viskoelastizität, Viskoplastizität). Hierzu gibt es Grundversuche um zunächst herauszufinden, in welche Kategorie das Material (und später das Materialmodell) gehört. Zunächst wird mit unterschiedlichen Dehnungsgeschwindigkeiten die Geschwindigkeitsabhängigkeit des Materials untersucht (hierbei reicht es nicht aus nur eine doppelt so schnelle Prozessführung zu wählen, da die meisten Materialien hierauf insensitiv reagieren; es wird eher an vier Versuche mit unterschiedlichen Dehnungsraten bei einer jeweiligen Änderung der Zehnerpotenz gedacht). Zudem werden auch eine Entlastung und Wiederbelastung durchgeführt. Hierbei kann man erkennen, ob das Material geschwindigkeitsabhängiges oder -unabhängiges Materialverhalten mit oder Gleichgewichtshysterese aufweist. Für Letzteres müsste ein theoretisch unendlich langsamer Prozess erfolgen, der nicht praktikabel erscheint, und von einem mehrstufigen Relaxationsversuch ersetzt wird, zu deren praktischen Einsatz siehe (Haupt & Sedlan 2001, Hartmann 2006, Sguazzo & Hartmann 2018, Martinez Page & Hartmann 2018). Hierbei erhöht man stufenweise die Belastung und hält die Verzerrung über eine Haltezeit konstant. Diese Haltezeit hängt von dem jeweiligen Material ab. Üblicherweise nehmen die Spannungen ab und die Spannungsgeschwindigkeiten gehen gegen Null. Leider kann dies sehr lange dauern, so dass hier meist Abschätzungen (Extrapolationen) des Verhaltens angenommen werden. Liegt hierbei ein Spannungsrelaxationsverhalten vor, so stellen die Abbruchpunkte der Spannungen einen Indikator für eine Gleichgewichtshysterese oder eine Gleichgewichtslinie dar. Über diese Versuche hinaus können auch zyklische Prozesse (bis zur Ermüdung) oder Prozesse bis zum Bruch des Materials – je nach Interesse bzw. Zielsetzung – präziser charakterisieren.

Ein großes Manko meist einaxialer Prozessführungen ist dabei, dass die darauf aufbauenden Materialmodelle die mehraxialen Belastungsprozesse schlecht wiedergeben. Daher existiert die Tendenz die Triaxialität in Materialeigenschaften sowohl experimentell als auch seitens der Modellierung zu erfassen. Hierzu stehen kombinierte Zug-Druck-Torsionsversuche, siehe zum Beispiel (Haupt & Lion 1995, Haupt & Sedlan 2001) oder Rohre unter axialer, torsionaler Belastung unter Innendruck zur Verfügung. Bei Böden zieht man Triaxialzellen heran, die eher einer zweidimensionalen Belastung axialsymmetrischer Proben unter Außendruck sowie Axialbelastung darstellen, (Wood 1990).

3. Materialmodellierung

Materielle Körper unterliegen Naturgesetzen. Diese sind in Form von Bilanzgleichungen der Thermomechanik entwickelt worden. Durch das formale Herausschneiden eines Körpers aus seiner Umgebung muss eine Bilanzierung erfolgen. Hierzu gehören die *Massen-, Impuls-, Drehimpuls-, Energie und Entropiebilanz*. Werden noch elektrische und magnetische Einflüsse berücksichtigt, so liegen weitere Bilanzgleichungen vor, siehe (Eringen & Maugin 1990). Neben diesen Bilanzgleichungen existieren Materialmodelle, die die Deformation und Temperatur mit Kräften (Spannungen) und dem Wärmefluss in Zusammenhang bringen. Im Rahmen der Thermomechanik fester Körper resultieren zwei partielle Differentialgleichungen zur Bestimmung der Verschiebungen (lokale Impulsbilanz, hier für den Fall quasistatischer Prozesse, dass Wellenausbreitungsphänomene sollen nicht auftreten) und der Temperatur (lokale Wärmeleitungsgleichung),

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \vec{k} &= \vec{0} \\ c_{\Theta}(\vec{u}, \Theta, \mathbf{q}) \dot{\Theta} &= -\kappa_{\Theta}(\vec{u}, \Theta, \mathbf{q}) \operatorname{grad} \Theta + r(\vec{u}, \dot{\vec{u}}, \Theta, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (1)$$

c_{Θ} und κ_{Θ} beschreiben die Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit, r eine Wärmequelle (-senke) und \vec{k} die Erdbeschleunigung. Massen- und Drehimpulsbilanz liefern jeweils zwei trivial erfüllbare Beziehungen (die Dichte in der Momentankonfiguration ρ des materiellen Körpers ist über den Deformationsgradienten mit der Dichte in der Ausgangskonfiguration ρ_R gekoppelt, $\rho_R = \rho \det \mathbf{F}$, und der Symmetrie des Spannungstensors, $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$). Die Entropiebilanz hingegen liefert eine Ungleichung, nämlich, dass die Entropieproduktion nicht negativ werden kann. Dies wird üblicherweise mit Hilfe der Clausius-Duhem Ungleichung formuliert, die wiederum einen direkten Einfluss auf die noch zu formulierenden Materialmodelle hat.

Seit vielen Jahrzehnten ist es die Aufgabe der Festkörpermechanik Materialmodelle zu entwickeln. Diese wurden zunächst ingenieurmäßig entwickelt und widersprachen einigen physikalischen Grundannahmen. Diese Grundannahmen sind schließlich in (Truesdell & Noll 1965) formuliert und geordnet worden, und repräsentieren verschiedene Axiome, wie die *Kausalität*, den *Determinismus*, die *Äquipräsenz*, die *Beobachterinvarianz*, die *Objektivität* und die *materielle Objektivität*, siehe hierzu auch (Eringen 1980, Krawietz 1986) sowie (Haupt 2002). Darüber hinaus sind Symmetrieeigenschaften zur Modellentwicklung anisotroper Materialien zu berücksichtigen. Materialmodelle beschreiben den Spannungszustand \mathbf{T} (Cauchyscher Spannungstensor) am materiellen Punkt \vec{X} in der Referenzkonfiguration zum Zeitpunkt t in Abhängigkeit der vergangenen Deformations- und Temperaturgeschichte

$$\mathbf{T}(\vec{X}, t) = \mathcal{F}[\mathbf{F}(\vec{X}, \tau), \Theta(\vec{X}, \tau), \vec{X}] \quad (2)$$

wobei \mathcal{F} ein Funktional darstellt (und durch gewöhnliche Differential- oder Integralgleichungen formuliert werden kann), $\mathbf{F} = \text{Grad } \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ dem Deformationsgradienten entspricht und Θ die absolute Temperatur widerspiegelt. $\vec{x} = \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ ist die Bewegung des materiellen Punktes $\vec{\chi}$, der sich zum Zeitpunkt t an der Stelle \vec{x} befindet. Da Integralgleichungen analytisch als auch numerisch schlecht zu lösen sind, haben sich gewöhnliche Differentialgleichung durchgesetzt, um geschichtsabhängiges Materialverhalten zu beschreiben. Dies führte auf die *Theorie der inneren Variablen*, also solchen Variablen, die wir physikalisch motivieren können, jedoch experimentell nicht identifizieren können, siehe (Coleman & Gurtin 1967). Die Entwicklungsgleichungen der inneren Variablen dienen zur Beschreibung des nichtlinearen, geschichtsabhängigen Verfestigungsverhaltens und bedingt die Kunst des Modellierers geeignete Modelle zu entwickeln, die insbesondere dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik (Entropieungleichung) sowie den oben genannten Axiomen genügen müssen. Hierzu ist eine Vielzahl an Materialmodellen entstanden, welche die folgende mathematische Struktur haben,

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{T}} &= \dot{\mathbf{h}}(\mathbf{C}, \Theta, \mathbf{q}) \\ \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}(\mathbf{C}, \Theta, \mathbf{q})\end{aligned}\quad (3)$$

bzw. bei kleinen Verzerrungen

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \mathbf{h}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}) \\ \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}),\end{aligned}\quad (4)$$

siehe auch (Lemaitre and Chaboche 1990). $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ ist der rechte Cauchy-Green Tensor und $\dot{\mathbf{T}} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}$ der 2. Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor. $\mathbf{E}(\vec{x}, t) = (\text{grad } \vec{u}(\vec{x}, t) + \text{grad } \vec{u}^T(\vec{x}, t))/2$ definiert den linearisierten Greenschen Verzerrungstensor und $\mathbf{q}^T = \{q_1, q_2, \dots, q_{n_q}\}$ den Vektor der inneren Variablen (die skalarwertig oder tensorwertig sein können; hier sind nur die Komponenten assembliert). Da auch algebraische Zwänge auftreten können, zum Beispiel bei Modellen der geschwindigkeitsunabhängigen Plastizität mit Fließfläche, kann \mathbf{A} eine singuläre Matrix darstellen.

Der Spannungszustand hängt von dem Verzerrungszustand \mathbf{E} ab, der wiederum von den drei Verschiebungskomponenten \vec{u} bestimmt ist. Zudem liegt die Abhängigkeit von der Temperatur Θ vor. Demgegenüber stehen vier partielle Differentialgleichungen für den Impuls und die Temperatur. Die inneren Variablen sind hingegen in dieser Modellbildung nicht durch partielle sondern nur durch gewöhnliche Differentialgleichungen bestimmt. Bevor wir auf die Lösung von \vec{u} , Θ und \mathbf{q} kommen, müssen noch weitere Anmerkungen bzgl. weiterer Modellierungskonzepte angemerkt werden.

Neben dieser als klassische Modellierung angesehene Vorgehensweise gibt es weitere Modellierungsansätze. So werden zum Beispiel die inneren Variablen

ebenfalls als partielle Differentialgleichungen formuliert, um zum Beispiel die Schädigung in Materialien zu beschreiben, siehe z.B. (Nedjar 2016). Dazu werden auch nichtlokale Modelle herangezogen, um Größeneffekte von Probenmaterialien zu berücksichtigen, die sogenannte Gradientenplastizität, siehe (Bertram 2017, Grammenoudis & Tsakmakis 2005). Auch werden mikromechanische (und auch in den Skalen darunter) Modelle numerisch gelöst, um mehr physikalische Effekte in die Modellbildung mit einzubeziehen (Molekulardynamik, Homogenisierungsverfahren, FE^2 , FFT, . . .), siehe auch (Geers et al. 2010, Müller et al. 2015). Die große Herausforderung ist hier die numerische Umsetzung bzw. der numerische Aufwand, um reale Bauteilsimulationen wiederzugeben.

4. Numerische Simulation

Zunächst war die numerische Simulation des Anfangsrandwertproblems (1) in Verbindung mit Materialmodellen vom Typ (3) bzw. (4) – bedingt durch die historische Code-Entwicklung der Methode der finiten Elemente – erfahrungsgestrieben. So wurde die partielle Differentialgleichung (1)₁ in die für die Methode der finiten Elemente erforderliche schwache Formulierung, in das Prinzip der virtuelle Verschiebungen überführt und ehemalige Finite-Elemente Programme für lineare Problemstellungen auf nichtlineare Fragestellungen geändert. Dies erfolgte zunächst für eine inkrementelle Formulierung der Impulsbilanz (1)₁ und erst anschließend in die derzeit am meisten verwendete Form des Prinzips der virtuellen Verschiebung. Intuitiv richtig hat man die Belastung stückweise aufgebracht – was der Zeitintegration entspricht – und das dabei entstehende nichtlineare Gleichungssystem so lange iteriert, bis dieses unter Einbindung der Materialmodelle (4) gegen eine Lösung konvergierte, siehe (Zienkiewicz 1984)⁴. Die wesentliche Schwierigkeit war hierbei die Einbindung der Materialmodelle vom Evolutionsgleichungstyp. Mit dem grundlegenden Artikel zur Behandlung solcher Materialmodelle (zunächst ein Modell der Elastoplastizität) haben Simo and Taylor (1985) die Begriffsbildung der *konsistenten* Linearisierung bei dieser Fragestellung geprägt. Hierbei haben sie den Satz über implizite Funktionen bei der Auswertung ihrer Gleichungen intuitiv richtig angewendet, um ein zu jedem Zeitpunkt quadratisch konvergierendes Verfahren zu erhalten. Aufgrund numerischer Untersuchungen der Iterierten hatten sie jedoch leider das Gesamtverfahren als Newton-Raphson Verfahren interpretiert. Viele Forscher folgen weiterhin dieser nicht in jedem Fall richtigen Terminologie. Diesbezüglich muss eine vertiefendene Begründung angefügt werden. In der Dissertation von (Wittekindt 1991) ist der Bezug der zuvor genannten Fragestellung der numerischen Festkörpermechanik zu mathematischen Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen gezogen und als Anwendung der vertikalen Linienmethode interpretiert worden.

⁴ Deutsche Übersetzung der 3. Auflage der englischsprachigen Ausgabe von 1977.

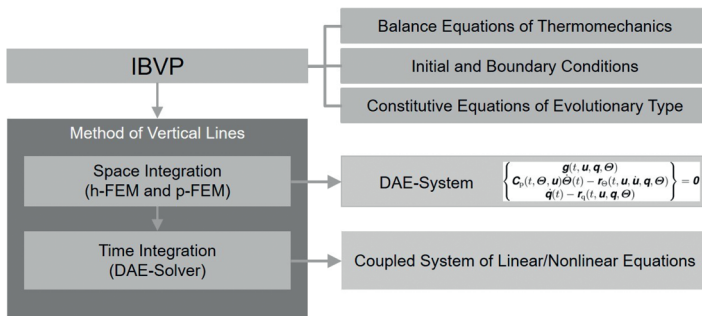


Abb. 5: Vertikale Linienmethode zur Lösung thermomechanischer Problemstellungen unter Einbindung von Materialmodellen vom Evolutionsgleichungstyp.

Hierbei wird zunächst die Raumdiskretisierung durchgeführt, hier die Methode der finiten Elemente, und anschließend ein Zeitdiskretisierungsverfahren auf die nach der Raumdiskretisierung entstehenden Gleichungen angewendet, siehe Abb. 5. Dies führt nach der Raumdiskretisierung der Gleichungen (1) und (4) auf das Algebra-Differentialgleichungssystem (DAE-System)

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(t, \mathbf{u}, \mathbf{q}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_q(t, \mathbf{u}, \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (5)$$

bei isothermen Problemstellungen bzw. bei thermomechanisch gekoppelten Fragestellungen auf

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(t, \mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{C}_\Theta \dot{\Theta}(t) &= \mathbf{r}_\Theta(t, \mathbf{u}, \dot{\Theta}, \Theta, \mathbf{q}), \\ \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_q(t, \mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (6)$$

$\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{n_u}$, $\mathbf{r}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_\Theta}$, $\mathbf{r}_q \in \mathbb{R}^{n_q}$, zuzüglich geeigneter Anfangsbedingungen. Hierbei stellen $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$ und $\Theta \in \mathbb{R}^{n_\Theta}$ die unbekannten Knotenverschiebungen bzw. -temperaturen dar, und $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n_q}$ repräsentiert den Vektor aller an allen räumlichen Integrationspunkten (üblicherweise Gauss-Punkte) auszuwertenden inneren Variablen. $\mathbf{C}_\Theta = \mathbf{C}_\Theta(t, \mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}^{n_\Theta \times n_\Theta}$ gibt die Wärmekapazitätsmatrix wieder. Fritzen (1997) hat diese Vorgehensweise dann im selben Fachgebiet der TU Darmstadt fortgesetzt und numerische Verfahren höherer Konvergenzordnung im Zeitbereich auf das DAE-System (5) angewendet. Dies hat wiederum Peter Ellsiepen, der durch diese Vorgehensweise an der gleichen Alma Mater der beiden Vorgänger geprägt wurde (und zur Promotion an die Universität Stuttgart wechselte), auf die Theorie

poröser Medien übertragen, (Ellsiepen 1999). Hierbei kam die Klasse einfach genauer, diagonal-impliziter Runge-Kutta Verfahren (SDIRK) zur Zeitintegration der DAE-Systeme zum Einsatz, wobei das einfachste darin enthaltene Verfahren das implizite Euler-Verfahren darstellt. Diese Verfahren (hier im nachfolgenden dargestellt) führt in jedem Zeitpunkt t_{n+1} auf ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}, \boldsymbol{\Theta}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{L}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}, \boldsymbol{\Theta}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n_u+n_\Theta}, \mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n_q}$$

Parallel zu diesen Erkenntnissen und Untersuchungen hat der Autor die Frage verfolgt, welches Lösungsverfahren zur Berechnung des nichtlinearen Gleichungssystems (7) herangezogen wird, welches auf die in der Methode der finiten Elemente übliche, geschachtelte iterative Berechnung (globales Newton-Raphson Verfahren zur Berechnung der Knotenverschiebungen \mathbf{u}_{n+1} (und Knotentemperaturen $\boldsymbol{\Theta}_{n+1}$) und der inneren Schleife zur Berechnung der inneren Variablen \mathbf{q}_{n+1} an den räumlichen Integrationspunkten (Gauss-Punkten)) mit dem durch Simo and Taylor (1985) geprägten Verfahren übereinstimmt. In (Hartmann 1998) ist gezeigt worden, dass dies dem sogenannten Multilevel-Newton Algorithmus (MLNA) entspricht, welcher bereits im Zusammenhang mit der numerischen Lösung elektrischer Netzwerke, (Rabbat et al. 1979), sowie nichtlinearer Optimierungsprobleme, (Hoyer & Schmidt 1984), bekannt war.⁵ In dem grundlegenden Beitrag (Ellsiepen & Hartmann 2001) ist dies dann publiziert worden, siehe auch (Hartmann 2005). Damit ist nunmehr klar, dass die in (Simo & Taylor 1985) dargestellte numerische Vorgehensweise nicht dem Newton-Raphson Verfahren entspricht. Bei genauerer Betrachtung ist zudem anzumerken, dass die gesamte Algorithmik aus Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens und des MLNA auf die Lösung eines Algebro-Differentialgleichungssystems bereits in (Rabbat et al. 1979), d.h. einer anderen wissenschaftlichen Community, bekannt war, siehe auch (Hartmann 1998).

Mit diesen Erkenntnissen sind eine Reihe von weiteren Untersuchungen und Anwendungen erfolgt, wie die Reaktionskraftberechnung bei Verschiebungssteuerung, der Einbindung von Nebenbedingungen wie plastische Inkompressibilität durch Projektionsverfahren, der Anwendung unterschiedlicher nichtlinearer Gleichungslöser, der Übertragung auf Fragen der Dynamik, der Übertragung auf große Deformationen, sowie der Erweiterung auf Mehrfeldprobleme, wie der thermischen Fluid-Struktur-Interaktion und der Elektro-Thermomechanik bei Sinterprozessen. Die numerische Zeitintegration der SDIRK-Verfahren hat – neben höheren Genau-

⁵ An dieser Stelle möchte sich der Autor nochmals recht herzlich bei Professor H. Schwetlick (TU Dresden) bedanken, der auf Nachfragen den Hinweis auf die Publikationen gegeben hat.

igkeiten – zudem den Vorteil, dass eine Schrittweitensteuerung auf der Basis der Schätzung der Zeitschritte durch fast verschwindenden Mehraufwand bereitgestellt wird, so dass damit heutzutage insbesondere Prozesse wie Kriechen oder Relaxation in sinnvollen Berechnungszeiten möglich sind. Des Weiteren löst die Zeitadaptivität auch die Frage nach einer geeigneten Schrittweite $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ bei gekoppelten Feldproblemen durch die Fehlerschätzer. Darüber hinaus bestand auch die Frage, ob andere Zeitintegrationsverfahren attraktiver sind, um den Aufwand der Berechnungen zu reduzieren. Hierzu sind BDF-Verfahren, zum Beispiel in (Eckert et al. 2004), oder Rosenbrock- bzw. halb-explizite Runge-Kutta Verfahren in (Rothe et al. 2012) herangezogen worden, um das DAE-System (6) zu behandeln. Auch ist der Frage gefolgt worden, ob man nicht nur den Zeitdiskretisierungsfehler durch Verfahren höherer Ordnung in Kombination mit Zeitadaptivität reduzieren kann, sondern auch den Raumfehler mit Finiten-Elementen höherer Ansatzordnung zu kombinieren, um den Diskretisierungsfehler zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen (1) in Kombination mit den Materialmodellen vom Evolutionsgleichungstyp zu minimieren. Hierzu ist die p-Version der Methode der finiten Elemente, siehe (Szabo & Babuska 1991, Düster 2002), mit SDIRK und Rosenbrock-Verfahren kombiniert worden, (Netz et al. 2013, Netz & Hartmann 2015). Jüngste Untersuchungen sind hierbei sogenannte Kontaktprobleme bei denen zwei deformierbarer Körper in Kontakt treten, die mit SDIRK-Verfahren und Schrittweitensteuerung sowie einer Mortar-Kontaktformulierung gekoppelt wurden, (Grafenhorst 2018). Es gibt aber auch Nachteile dieser Vorgehensweise. So wird zum Beispiel die zeitliche Konvergenzordnung bei nichtlinearen Dirichlet-Randbedingungen parabolischer und hyperbolischer Problemstellungen nicht erreicht und nur durch einen Trick berücksichtigt, (Alonso-Mallo 2002, Alonso-Mallo & Cano 2004, Rothe et al. 2015). Auch sind Fragen bei Problemen mit unterschiedlichen Zeitskalen derzeit offen, wie sie in mehrskaligen und multiphysikalischen Problemstellungen auftreten können.

5. Materialparameteridentifikation

Die in den Gleichungen (3) bzw. (4), bzw. auch in der Wärmeleitungsgleichung auftretenden Materialmodelle haben bisher noch unbestimmte Materialparameter $\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_\kappa}$, die an geeignete experimentelle Daten $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^{n_d}$ anzupassen sind. Eine konzeptionelle Vorgehensweise ist die Methode der kleinsten Quadrate (least-square method), bei der das Quadrat des Abstandes $\tilde{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{\kappa})$ aus dem Modell $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\kappa})$ und den experimentellen Daten \boldsymbol{d} minimal sein soll

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{r}}^T(\boldsymbol{\kappa}) \tilde{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\kappa}) - \boldsymbol{d} \}^T \{ \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\kappa}) - \boldsymbol{d} \} \rightarrow \min. \quad (8)$$

Diese Fragestellung ist insbesondere in den 1970-Jahren intensiv für allgemeine Fragestellungen untersucht worden, (Beveridge and Schechter, 1970; Beck and Arnold, 1977) bzw. (Draper and Smith, 1998). Dabei entstehen entweder lineare

oder nichtlineare zu lösende Gleichungssysteme, die mit sogenannten numerischen Optimierungsmethoden mit und ohne Nebenbedingungen iterativ gelöst werden, siehe zum Beispiel (Spellucci 1993, Dennis & Schnabel 1996, Nocedal & Wright, 1999). Über die Anwendung solcher Methoden im Rahmen der Festkörpermechanik sei zunächst auf (Thielecke 1997) verwiesen. Man kann aber sagen, dass nur relativ wenige deutsche Wissenschaftler auf diesem Gebiet arbeiten, da hierbei die Bandbreite aus Experiment, Modellbildung und Numerik erforderlich ist und zudem eine erfahrungsbasierte Vorgehensweise zur Bestimmung der Parameter durchzuführen ist. Leider gibt es derzeit kein Verfahren, welches auf beliebige Modelle anwendbar erscheint.

Die Materialparameteridentifikation stellt ein sogenanntes *inverses Problem* dar, da man aus einer beschränkten Anzahl an Messinformationen auf die zugehörigen Parameter der Modellvorhersage schließen muss. Dies führt nur in Spezialfällen zu eindeutigen Lösungen. Daher existieren eine Reihe von Fragestellungen, die von Interesse sind:

- (1) Welches numerische Verfahren ist geeignet, um Problem (8) auch unter Einbindung von Ungleichungsnebenbedingungen effizient zu lösen?
- (2) Welche (numerischen) Vorgehensweisen existieren zur Bestimmung der Materialparameter des Problems (3) bzw. (4)?
- (3) Wie und mit welchem Experiment kann man die Materialparameter (evtl. einzeln) ansprechen? Was sind die experimentellen Daten, die durch das Experiment geliefert werden können?
- (4) Wie ist die Qualität (Sensitivität gegenüber Messfehler, Eindeutigkeit, . . .) der gefundenen Parameter?
- (5) Gibt es überhaupt Experimente und Belastungsprozesse, welche die Materialparameter adressieren?
- (6) Existieren spezielle Reihenfolgen der Identifikation, d.h. das Heranziehen spezieller Messungen um mit Untermengen an Parametern aus \mathbf{K} den gesamten Satz an Parametern zu bestimmen?

Üblicherweise werden Gauss-Newton ähnliche Verfahren herangezogen, um das Minimalproblem (8) zu behandeln, die lediglich lokale Minima detektieren können. Andere Verfahren, wie zum Beispiel die Evolutionsstrategie, siehe (Rechenberg 1973), erfordern eine sehr hohe Anzahl an Auswertungen und sind bei teuren Berechnungen von $\mathbf{s}(\mathbf{K})$ ineffizient. Heutzutage sind die Algorithmen derart stabil programmiert, dass man üblicherweise einen Satz an Parametern erhält. Leider liegen zum Teil Parameter außerhalb physikalisch sinnvoller Bereiche vor, sie variieren bei geänderten Startbedingungen der zumeist iterativen Verfahren oder die Lösungen des Modells $\mathbf{s}(\mathbf{K})$ sehen unzureichend aus. Daher besteht die Frage nach der Qualität bzw. Maßen zur Charakterisierung der Qualität des Identifikationsprozesses. Aufgrund der üblicherweise nichtlinearen Least-Square

Problematisierung kann man das Problem in der Lösung $\mathbf{\kappa}^*$ durch ein lineares Least-Square Problem nähern und abschätzende Maße wie das Konfidenzintervall oder die Korrelation zwischen Parametern sowie mit Hilfe der Hesse-Matrix auch das Konzept der Identifizierbarkeit verwenden, (Beveridge & Schechter 1970; Beck & Arnold 1977), siehe auch (Hartmann & Gilbert 2002, Hartmann et al. 2018). Insbesondere das Konzept der Identifizierbarkeit kann dazu dienen, um herauszufinden, welche Experimente überhaupt geeignet sind gewisse Materialparameter anzusprechen. Auch kann man sehr schnell feststellen, dass es zum Teil unmöglich ist, alle Materialparameter gleichzeitig zu identifizieren. Hierbei sind gewisse Untermengen an Parametern an spezielle Experimente anzupassen (Beispiel: Materialmodelle vom Überspannungstyp). Mit anderen Worten muss die Kenntnis über das Verhalten des Modells vorliegen, um Parameter identifizieren zu können, bzw. umgekehrt die Kenntnis der Identifizierbarkeit der Parameter muss auch in die Modellierung eingehen. Gerade diese Fragen haben auch dazu geführt, dass die Materialmodellentwicklung von der Identifizierbarkeit abhängig ist. Die Parameteridentifikation, d.h. die Kalibrierung des Modells an Messdaten, stellt daher einen erfahrungsbasierten Prozess dar.

Da zumeist keine optischen Messdaten über die Deformation (oder auch Temperatur) auf den Oberflächen der Proben vorliegen, sondern lediglich resultierende Traversenverschiebungen – oder lokale Dehnungen (Dehnungsmessstreifen, Ansatzdehnungsaufnehmer, siehe Abschnitt 2) – oder Kräfte durch Experimente aufgenommen werden, sind Zugversuche (oder auch Torsionsversuche dünnwandiger Rohrquerschnitte) üblicherweise die erste Wahl, um unter der Annahme homogener Deformationen und Spannungen (die Verzerrungen und Spannungen werden hierbei in einem gewissen Gebiet der Probe als konstant angesehen) die Materialgleichungen (3) bzw. (4) komponentenweise auszuwerten. Ein häufiger Trugschluss liegt darin, dass man stattdessen eindimensional entwickelte Materialmodelle heranzieht und nicht die dreidimensionalen Gleichungen für den Spezialfall des einaxialen Zuges auswertet, was üblicherweise zu anderen Beziehungen und damit auch zu unterschiedlichen Materialparametern führt. Daher ist in (Krämer et al. 2015) ein Verfahren vorgestellt worden, welches dieses konsistent durch die DAE-Interpretation umgeht und den Vorteil hat, dass direkt der für die Finite-Elemente Berechnung erforderliche Spannungsalgorithmus inklusive der erzeugten konsistenten Tangenten verwendet werden kann.

Liegen keine homogenen Deformationen in einer Probe vor (was meist der Fall ist, wenn man von den sehr wenigen zuvor genannten Versuchen absieht), so muss zur Bestimmung von $\mathbf{s}(\mathbf{\kappa})$ das gesamte Anfangsrandwertproblem (1) und (4) gelöst werden. Dies wurde intensiv von (Andresen et al. 1996, Mahnken & Stein 1996, 1997) vorangetrieben (für weitere Literatur siehe (Hartmann 2017)). Leider ist hierbei jedoch nicht auf die konsistente Interpretation des Lösungskonzeptes der vertikalen Linienmethode aus Abschnitt 4 zurückgegriffen, d.h. der Lösung von DAE-Systemen, eingegangen worden. Schaut man in die mathematische Literatur

zur Identifikation von Parametern bei gewöhnlichen Differentialgleichungen, DAE-Systemen oder auch partiellen Differentialgleichungen, so ist dort das Werk von Schittkowski (2002) zu erwähnen, in welchem diese Fragestellungen adressiert werden. Hierbei werden anstelle der numerischen Differentiation des gesamten Codes (external numerical differentiation) von den in Gauss-Newton ähnlichen Verfahren erforderlichen Funktionalmatrizen analytisch aufgestellt (internal numerical differentiation), was einen enormen Rechenzeitgewinn verspricht. Zudem ist hiermit eine durchgängige Darstellung gefunden worden, die auf viele weitere DAE-Löser und Problemstellungen adaptierbar ist. Dies wird in (Hartmann 2017) untersucht und auf das DAE-System (5) übertragen, so dass eine konsistente Darstellung und Algorithmik existiert. Dabei wird für jeden Zeitpunkt t_{n+1} aus dem System (7) in der Form (hier nur dargestellt für den isothermen Fall und Problemen ohne Kräfte als Messdaten)

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}), \mathbf{q}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{L}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}), \mathbf{q}_{n+1}(\boldsymbol{\kappa}), \mathbf{q}_n(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (9)$$

die für das Gauss-Newton ähnliche Verfahren erforderliche Matrix $\partial \mathbf{u}_{n+1} / \partial \boldsymbol{\kappa}$ bestimmt.

Alternativ zu Gauss-Newton ähnlichen Verfahren bei Least-Square Problemen sind zum Beispiel die *Virtual-Field Method*, (Pierron & Grédiac 2012), probabilistische Verfahren, (Tarantola 2005, Rosić et al. 2013), oder auch Neuronale Netze, (Huber & Tsakmakis 1999a,b), welche aber alle nicht die Problematik der Qualität der Parameter verbessern können. Auf diese Verfahren sei hier nicht im Speziellen eingegangen.

6. Verifikation und Validierung

Da numerische Modelle zur Vorhersage des realen Bauteilverhaltens dienen, besteht die Frage nach der Qualität einer solchen Prognose. Es gibt eine Vielzahl an Unsicherheiten, die hierbei eingehen. Zunächst basieren die Erkenntnisse nur auf einer beschränkten Anzahl an Experimenten, die bereits zu fehlerbehafteten Daten führen. Dann werden Identifikationstools herangezogen, um die Materialparameter von ausgewählten Materialmodellen zu bestimmen, und zuletzt werden Simulationen durchgeführt, bei denen unsichere Anfangs- und Randbedingungen (Lagerungen, Belastungen) sowie Näherungsalgorithmen zur Berechnung eingehen. Daher muss man sich die Frage stellen, wie einerseits die Ergebnisse produziert werden und andererseits welche Aussagekraft sie haben? Diese Problemstellung ist gekoppelt mit dem Forschungszweig *Verifikation und Validierung* (V&V). Zunächst muss hierbei die terminologische Differenzierung von Verifikation und Validierung erfolgen, da diese sehr häufig als Synonyme ihre Verwendung finden.

Diese Diskussion ist in dem grundlegenden Beitrag von Babuska & Oden (2004) behandelt worden. Eine sehr grobe Veranschaulichung in Form von Fragen lassen sich folgendermaßen angeben: Verifikation behandelte die Frage “Löst man die Gleichungen richtig?”, und Validierung diskutiert “Löst man die richtigen Gleichungen?”. Die Verifikation wird hierbei so verstanden, dass es zunächst nicht darauf ankommt, ob die Physik richtig beschrieben wird, sondern, ob das numerische Berechnungsverfahren “richtige” Antworten liefert. Dies bedeutet, dass man Aussagen über die numerische Genauigkeit der Lösung der partiellen Differentialgleichung angeben kann und ist einerseits mit Code-Verifikation und andererseits mit der Berechnungsverifikation verbunden. In diesem Sinne ist Verifikation ein Prozess mit dem man die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Berechnung sichert. Die Code-Verifikation repräsentiert daher die Überprüfung der Implementierung des mathematischen Modells, was mitunter auch den Vergleich zu analytischen Lösungen oder den Vergleich zu hochgenauen Lösungen anderer Verfahren impliziert. Die Berechnungsverifikation hingegen umschreibt die Bewertung der Genauigkeit der Berechnung und ist verbunden mit Zeit- und Raumadaptivität des Lösungsverfahrens, um unterhalb von nutzerdefinierten Fehlertoleranzen zu bleiben. Derzeit gibt es leider kein allgemeingültiges adaptives Verfahren für die Problemstellung (1) und (4). Die Validierung beinhaltet hingegen den Vergleich aus Vorhersage und numerischer Prädiktion, wozu Maße über die Qualität heranzuziehen sind. Auch die Validierung ist ein Prozess, bei dem die Genauigkeit des physikalischen Modells im Hinblick auf dessen Verwendungszweck behandelt wird.

Das Konzept aus V&V ist mittlerweile als Empfehlung in die Normen der “American Society of Mechanical Engineers” eingegangen, (The American Society of Mechanical Engineers, 2006) und ist stark verbunden mit der Berücksichtigung von Unsicherheiten, siehe hierzu auch (Oberkampf & Trucano 2002, Roache 1998, Schwer 2001). Insbesondere sei auch auf die Modelladaptivität hingewiesen, d.h. man passt nicht nur die Diskretisierungsverfahren an numerische Ungenauigkeiten an, sondern auch die Materialmodelle, (Oden 2018). In diesem Sinne ist die zum Anfang jeder Modellierung gefragte Zielsetzung des Modells von hohem Interesse, da zu komplexe Modelle manchmal für die eigentliche, ursächliche Zielsetzung bei weitem zu anspruchsvoll und damit nicht erforderlich sind. V&V ist ein sehr aktuelles sowie offenes Feld und wird leider in Deutschland im Bereich der Festkörpermechanik nur punktuell behandelt.

7. Zusammenfassung

Die Modellierung von Materialeigenschaften für Materialien unseres täglichen Gebrauchs, im Gebrauch selbst sowie in seiner Herstellung, unterliegt zunächst des Interesses nach der ursächlichen Intention, für was das Modell konzipiert werden soll. Hierauf aufbauend entsteht ein Prozess zur Durchführung von Experimenten,

der Entwicklung mathematischer Modelle unter Berücksichtigung physikalischer Restriktionen, einer konsistenten numerischen Behandlung und der Kalibrierung an die zuvor durchgeführten Experimente bzw. deren experimentellen Daten. Dieser Prozess ist in seiner vollständigen Durchdringung der verwendeten Numerik nahezu abgeschlossen. Damit ist jedoch nicht der Aufwand impliziert, der bei neuen physikalischen Phänomenen für bisher noch nicht modellierte Materialien auftritt, sowohl in der Durchführung der Experimente, als auch in der Modellbildung und Parameteridentifikation. Alles in allem stellt dies einen aufwändigen, erfahrungs-basierten Prozess dar. Bei Mehrfeldproblemen exponiert sich der Aufwand durch die physikalischen Kopplungen und bei Mehrskaligkeit ist derzeit die Behandlung der Gesamtproblematik aus Experiment, Modellbildung, Numerik und Identifikation ein vollkommen offenes Feld. Umklammert wird dies durch kontinuierliche Verifikation der Programmierungen und der Validierung der physikalischen Modellbildung unter Berücksichtigung von Unsicherheiten. Wenn man die vergangenen 50 Jahre als fortschreitende Entwicklung betrachtet, so liegt eine gewisse Zuversicht für die Lösung der vielen anstehenden Probleme vor.

Literatur

- ALONSO-MALLO, I. (2002): Runge-Kutta methods without order reduction for linear initial boundary value problems. – *Numerische Mathematik* **91**: 577–603.
- ALONSO-MALLO, I. & B. CANO (2004): Avoiding order reduction of Runge-Kutta discretizations for linear time-dependent parabolic problems. – *BIT Numerical Mathematics* **44**: 1–20.
- ANDRESEN, K., S. DANNEMEYER, H. FRIEBE, R. MAHNKEN, R. RITTER & E. STEIN (1996): Parameteridentifikation für ein plastisches Stoffgesetz mit FE-Methoden und Rasterverfahren. – *Bauingenieur* **71**: 21–31.
- BABUSKA, I. & J.T. ODEN (2004): Verification and validation in computational engineering and science: basic concepts. – *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**: 4057–4066.
- BECK, J.V. & K.J. ARNOLD (1977): Parameter estimation in engineering science. John Wiley & Sons, New York, 1st edition.
- BERTRAM, A. (2017): Compendium on gradient materials. http://www.redaktion.tu-berlin.de/fileadmin/fg49/publikationen/bertram/Compendium_on_Gradient_Materials_Dec_2017.pdf. Accessed: 2018-12-15.
- BEVERIDGE, G.S.G. & R.S. SCHECHTER (1970): Optimization: theory and practice. McGraw-Hill Book Company, New York, 1st edition.
- CALLOCH, S. & D. MARQUIS (1999): Triaxial tension-compression tests for multiaxial cyclic plasticity. – *International Journal of Plasticity* **15**: 521–549.

COLEMAN, B.D. & M.E. GURTIN (1967): Thermodynamics with internal state variables. – *The Journal of Chemical Physics* **47**: 597–613.

DENNIS, J.E. & R.B. SCHNABEL (1996): Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations, volume 16 of *Classics in Applied Mathematics*. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.

DRAPER, N.R. & H. SMITH (1998): *Applied regression analysis*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 3 edition.

DÜSTER, A. (2002): *High order finite elements for three-dimensional, thin-walled nonlinear continua*. Shaker Verlag, Aachen.

ECKERT, S., H. BAASER, D. GROSS & O. SCHERF (2004): A BDF2 integration method with stepsize control for elastoplasticity. – *Computational Mechanics* **34**(5): 377–386.

ELLSIEPEN, P. (1999): *Zeitund ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien*. Doctoral thesis, Institute of Mechanics II, University of Stuttgart. Report No. II-3.

ELLSIEPEN, P. & S. HARTMANN (2001): Remarks on the interpretation of current non-linear finite-elementanalyses as differential-algebraic equations. – *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **51**: 679–707.

ERINGEN, A.C. (1980): *Mechanics of Continua*. R.E. Krieger Publishing Company, New York, 2nd edition.

ERINGEN, A.C. & G.A. MAUGIN (1990): *Electrodynamics of Continua I: Foundations and solid media*. Springer-Verlag, New York, 1 edition.

FRITZEN, P. (1997): *Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts und Plastizitätstheorie*. Doctoral thesis, Department of Mathematics, University of Darmstadt.

GEERS, M.G.D., V.G. KOUZNETSOVA & W.A.M. BREKELMANS (2010): Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. – *Journal of Computational and Applied Mathematics* **234**: 2175–2182.

GRAFENHORST, M. (2018): *Zeitadaptive Finite-Elemente-Berechnungen thermomechanisch gekoppelter Problemstellungen sowie Mortarkontakt*. Phd-thesis, report no. 2/2018, Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology, Clausthal-Zellerfeld.

GRAMMENOUDIS, P. & C. TSAKMAKIS (2005): Finite element implementation of large deformation micropolar plasticity exhibiting isotropic and kinematic hardening effects. – *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **62**: 1691–1720.

HARTMANN, S. (1998): Zur Berechnung inelastischer Festkörper mit der Methode der finiten Elemente. In: HARTMANN, S., P. HAUPT, & V. ULBRICHT (editors): *Modellierung und Identifikation*, pages 119–130, Kassel. Gesamthochschul-Bibliothek.

HARTMANN, S. (2005): A remark on the application of the Newton-Raphson method in non-linear finite element analysis. – *Computational Mechanics* **36**(2): 100–116.

HARTMANN, S. (2006): A thermomechanically consistent constitutive model for polyoxymethylene: experiments, material modeling and computation. – *Archive of Applied Mechanics*, **76**: 349–366.

HARTMANN, S. (2017): A remark on material parameter identification using finite elements based on constitutive models of evolutionary-type. – *Computer Assisted Methods in Engineering and Science* **24**: 113–126.

HARTMANN, S. & R.R. GILBERT (2002): Identifiability of material parameters in solid mechanics. – *Archive of Applied Mechanics* **88**(1): 3–26.

HARTMANN, S., R.R. GILBERT & C. SGUAZZO (2018): Basic studies in biaxial tensile tests. *GAMMMitteilungen*, 41:e201800004.

HAUPT, P. (1993): On the mathematical modelling of material behavior in continuum mechanics. – *Acta Mechanica* **100**: 129–154.

HAUPT, P. (2002). *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer, Berlin, 2 edition.

HAUPT, P. & A. LION (1995): Experimental identification and mathematical modelling of viscoplastic material behavior. – *Journal of Continuum Mechanics and Thermodynamics* **7**: 73–96.

HAUPT, P. & K. SEDLAN (2001): Viscoplasticity of elastomeric materials. experimental facts and constitutive modelling. – *Archive of Applied Mechanics* **71**: 89–109.

HILD, F. & S. ROUX (editors) (2013): *Full-field Measurements and Identification in Solid Mechanics*. Wiley & Sons, London.

HOYER, W. & J.W. SCHMIDT (1984): Newton-type decomposition methods for equations arising in network analysis. – *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, **64**: 397–405.

HUBER, N. & C. TSAKMAKIS (1999a): Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural networks, Part I: plasticity with nonlinear and kinematic hardening. – *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **47**: 1589–1607.

HUBER, N. & C. TSAKMAKIS (1999b): Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural networks, Part II: the case of pure kinematic hardening in plasticity laws. – *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **47**: 1569–1588.

KRÄMER, S., S. ROTHE & S. HARTMANN (2015): Homogeneous stress-strain states computed by 3D-stress algorithms of FE-codes: application to material parameter identification. – *Engineering with Computers* **31**: 141–159.

KRAWIETZ, A. (1986): *Materialtheorie*. Springer, Berlin, 1st edition.

- LEMAITRE, J. & J.-L. CHABOCHE (1990): *Mechanics of solid materials*. Cambridge University Press, Cambridge.
- MAHNKEN, R. & E. STEIN (1996): A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method. – *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **136**: 225–258.
- MAHNKEN, R. & E. STEIN (1997): Parameter identification for finite deformation elastoplasticity in principal directions. – *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **147**: 17–39.
- MARTINEZ PAGE, M.A. & S. HARTMANN (2018): Experimental characterization, material modeling, identification and finite element simulation of the thermo-mechanical behavior of a zinc die-casting alloy. – *International Journal of Plasticity* **101**: 74–105.
- MÜLLER, V., M. KABEL, H. ANDRÄ & T. BÖHLKE (2015): Homogenization of linear elastic properties of short-fiber reinforced composites – a comparison of mean field and voxel-based methods. – *International Journal of Solids and Structures* **67–68**: 56–70.
- NEDJAR, B. (2016): On a concept of directional damage gradient in transversely isotropic materials. – *International Journal of Solids and Structures* **88–89**: 56–67.
- NETZ, T., A.-W. HAMKAR & S. HARTMANN (2013): High-order quasi-static finite element computations in space and time with application to finite strain viscoelasticity. – *Computers and Mathematics with Applications* **66**: 441–459.
- NETZ, T. & S. HARTMANN (2015): A monolithic finite element approach using high-order schemes in time and space applied to finite strain thermo-viscoelasticity. – *Computers and Mathematics with Applications* **70**: 1457–1480.
- NOCEDAL, J. & S.J. WRIGHT (1999): *Numerical Optimization*. Springer, New York.
- OBERKAMPF, W.L. & T.G. TRUCANO (2002): Verification and validation in computational fluid dynamics. – *Progress in Aerospace Sciences* **38**: 209–272.
- ODEN, J. T. (2018): Adaptive multiscale predictive modelling. – *Acta Numerica*, 27.
- PIERRON, F. & M. GRÉDIAC (2012): *The virtual fields method*. Springer, New York, 1 edition.
- RABBAT, N.B.G., A.L. SANGIOVANNI-VINCENTELLI & H.Y. HSIEH (1979): A multilevel Newton algorithm with macromodeling and latency for the analysis of large-scale nonlinear circuits in the time domain. – *IEEE Transactions on Circuits and Systems* **26**: 733–740.
- RECHENBERG, I. (1973): *Evolutionsstrategie – Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution*. Frommann-Holzboog, Stuttgart, GER.
- ROACHE, P. J. (1998): *Verification and validation in computational science and engineering*. Hermosa Publ., Albuquerque.

ROSIĆ, B.V., A. KUČEROVÁ, J. SÝKORA, O. PAJONK, A. LITVINENKO & H.G. MATTHIES (2013): Parameter identification in a probabilistic setting. – *Engineering Structures* 50.

ROTHE, S., A.-W. HAMKAR, K.J. QUINT, & S. HARTMANN (2012): Comparison of diagonal-implicit, linear-implicit and half-explicit Runge-Kutta methods in non-linear finite element analyses. *Archive of Applied Mechanics*, **82**(8): 1057–1074.

ROTHE, S., J.-H. SCHMIDT & S. HARTMANN (2015): Analytical and numerical treatment of electrothermo-mechanical coupling. – *Archive of Applied Mechanics* **85**: 1245–1264.

SCHITTKOWSKI, K. (2002): Numerical data fitting in dynamical systems. Kluwer Academic Publ., Dordrecht.

SCHWER, L. (2001): Constitutive model verification and validation. http://www.mech.northwestern.edu/fac/cao/nsfworkshop/briefs/Schwer_p1.pdf.

SGUAZZO, C. & S. HARTMANN (2018): Tensile and shear experiments using polypropylene/polyethylene foils at different temperatures. – *Technische Mechanik* **38**: 166–190.

SIMO, J.C. & R.L. TAYLOR (1985): Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. – *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **48**: 101–118.

SPELLUCCI, P. (1993): Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung. Birkhäuser, Basel.

SUTTON, M.A., J.-J. ORTEU & H.W. SCHREYER (2009): Image correlation for shape, motion and deformation measurements. Springer, New York, 1st edition.

SZABO, B. & I. BABUSKA (1991): Finite Element Analysis. Wiley, New York.

TARANTOLA, A. (2005): Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.

The American Society of Mechanical Engineers (2006). Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics, volume ASME V&V 10-2006. New York.

THIELECKE, F. (1997): Parameteridentifizierung von Simulationsmodellen für das viskoplastische Verhalten von Metallen Theorie, Numerik, Anwendung. No. 34-1998, Technische Universität Braunschweig.

TRUESDELL, C. & W. NOLL (1965): The Non-Linear Field Theories of Mechanics, volume III/3 of *Encyclopedia of Physics*. Springer Verlag, Berlin.

WITTEKINDT, J. (1991): Die numerische Lösung von Anfangs-Randwertproblemen zur Beschreibung inelastischen Werkstoffverhaltens. Doctoral thesis, Department of Mathematics, University of Darmstadt. Wood, D.M. (1990). Soil behavior and critical state soil mechanics. Cambridge University Press, Cambridge.

ZIENKIEWICZ, O.C. (1984): Methode der finiten Elemente. Carl Hanser, München, 2nd edition.